研究会報告

5. 結晶表面のFacet端におけるUniversalなガウス曲率のとびと結晶表面自由エネルギーの一般形

群大工短大、神奈川大工[A]、横浜国大工[B]

山本隆夫、阿久津泰弘[A]、阿久津典子[B]

流体と熱平衡状態にある結晶がファセットと曲面によって囲まれている時のファセットの縁の近くの曲面の様子に注目する。ファセット端には、大別してsharpなもの（面の傾きがファセット端で不連続）と、smoothなもの（面の傾きが連続）がある。我々は、smoothなファセット端に注目する。従来、smoothなファセット端においては、ファセットの輪郭に垂直な方向の曲率がファセット端までの距離の1/2乗で発散するというGuruber-Mullins[1)]-Pokrovsky-Talapov[2)](GMPT)タイプのユニヴァーサルな性質が知られている。我々はより幾何学的に意味のある量であるガウス曲率について調べ、そのユニヴァーサルな性質について報告した[3-5)]。

Faceting転移温度以下の温度領域について議論するので、結晶格子の持つ異方性を正確に取り入れることが重要となる。結晶表面のモデルとして二つのタイプのTSK(Terrace-Step-Kink)モデル[2)]（微視的なTSKモデル[3、6)]と粗視的なTSKモデル[4、5)]）を選ぶ。

微視的なTSKモデルでは、Fig. 1に示すように、StepおよびKinkの具体的な構造を考えその形態の各々に対してボルツマン因子を与え、そのStep-Kink系の自由エネルギーを結晶表面の自由エネルギーとみなす。この時重要なのは、Step同志は重なれないという不透過条件である。この不透過条件を常に考慮しながら微視的にみたときの結晶の異方性を正確に取り入れられる方法としてLattice Fermion 法[7,8)]がある。Lattice Fermion 法を用いてまず、Fig. 1に示すようにStepが一つの方向に沿って切れることなく戻ることなく走っているモデル（モデルA）[3)]についてまず考え、次に、Fig. 2にしめすisland状の励起をを許したモデル（モデルB）について解析した。一つのファセットがxy平面にのっているとし、そのファセット近くの面の形を長さの単位を適当にとって、Z＝Z（X, Y）で示すとする。モデルA、モデルB共に、結晶の熱平衡形は

$$Z = \min_{\rho} \left[\left(X_c(Y) - X \right) \rho + B(Y) \rho^3 \right], \tag{1}$$

で与えられる[3)]。ここで、結晶の対称性より $X \geqq 0$ の領域のみについて述べている。$X=X_c(Y)$ はファセットの形を示し、$X_c(Y)$ 及び $B(Y)$ の形はモデルＡとモデルＢで異なるが、共に次の関係式を満たしている。

$$X_c''(Y) = -6\beta^2 B(Y), \tag{2}$$

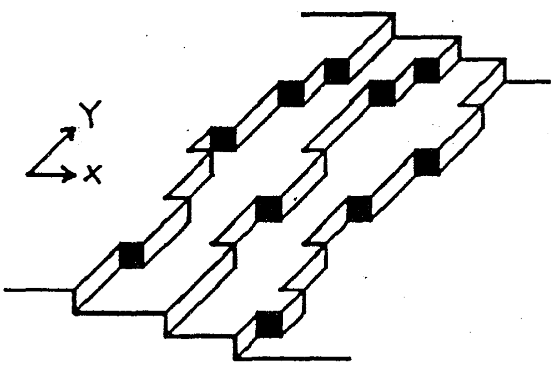
ここで、$\beta=(k_B T)^{-1}$、k_B はボルツマン定数、T は絶対温度。ファセット端近くにおいては、ガウス曲率Ｋは、

$$K = (\partial^2 Z/\partial X^2)(\partial^2 Z/\partial Y^2) - (\partial^2 Z/\partial X \partial Y)^2。 \tag{3}$$

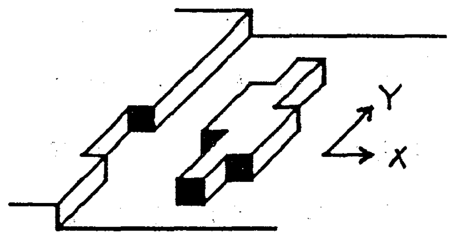
で与えられる。（１）、（２）、（３）よりファセト端近くのガウス曲率は次のように振舞う。

$$K = \begin{cases} \beta^2/\pi^2 & ：曲面上のファセト端近傍 \\ 0 & ：ファセット上 \end{cases} \tag{4}$$

このガウス曲率のとびの形はファセットの縁の位置（すなわちＹの値）、温度によらない。



Ｆｉｇ．１



Ｆｉｇ．２

次に、(3) で示される曲率のとびがより一般的に成り立つことを示すために粗視的なＴＳＫモデルを解析する。Step系を粗視的にみたとき、Stepは単位長さ当り $\gamma(\theta)$ （θ はStepの方向とｙ軸のなす角）の自由エネルギーをもつ紐と見なせる。そして、結晶の異方性の反映として、$\gamma(\theta)$ の方位依存性以外にStepのゆらぎの方位依存性が現れる。充分長い長さ ℓ の θ 方向に沿ったStepの ℓ の1/2乗でスケールしたゆらぎ $\sigma(\theta)$ の２乗は、

$$\sigma^2(\theta) = \beta^{-1}\left(\gamma(\theta) + \gamma''(\theta) \right)^{-1} \tag{4}$$

となることが分かっている。[9] Fermion 法に基づいた Transfer Matrix 法では、ゆらぎ幅が σ であるような不透過な θ 方向に沿った n 本の紐の自由エネルギーは、次で示される”ハミルトニアン” H の基底固有値として得られる。[4,5,10]

$$H = \int_0^L dx[\gamma(\theta)a^{\dagger}(x)a(x) + \tfrac{1}{2}\beta^{-1}\sigma^2(\theta)(\partial a^{\dagger}(x)/\partial x)(\partial a(x)/\partial x)] \quad (5)$$

但し、L^2 はいま考えている面のサイズ、a(x) は Fermion operator。そして、Fermion の数は n に固定したヒルベルト空間でのみ考えるとする。

（４）、（５）より、結晶面の傾き $\mathbf{p}$ =（ρ、θ）の面の単位射影面面積当りの自由エネルギーは、

$$f(\rho,\theta) = \gamma(\theta)\rho + \pi^2(6\beta^2)^{-1}[\gamma(\theta)+\gamma''(\theta)]^{-1}\rho^3 \quad (6)$$

となる。ここで、$\rho = n/L = |\mathbf{p}|$。表面自由エネルギーと”曲率テンソル”の間に成り立つ一般的な関係式、[11]

$$K_{ij}F_{jk} = -\delta_{ik}, \quad (7)$$

但し、

$$K_{ij} = \partial^2 Z/\partial X_i \partial X_j : \quad (X_1 = X,\ X_2 = Y),$$

$$F_{ij} = \partial^2 f/\partial p_i \partial p_j : \quad (p_1 = p_x = \partial Z/\partial X,\ p_2 = p_y = \partial Z/\partial Y)、$$

を用いてガウス曲率を計算すると、（４）式が得られる。

以上の結果より、（４）式で示されるファセット端でのガウス曲率のとびは

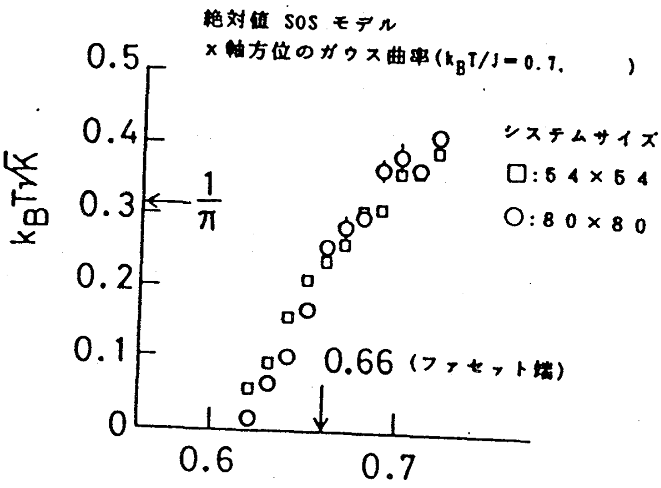
＊広いクラスの系で成立する。

＊Faceting 温度以下の全ての温度で成立する。

＊ファセット端のどの部分でも成立する。

という意味で、ユニヴァーサルなものであることが結論される。

さらに、我々は絶対値ＳＯＳモデルに対するモンテカルロ計算を行った結果（Ｆｉｇ．３）finite-size rounding を考慮すれば、（４）式と consistent である結果が得られた。



Ｆｉｇ．３

一方、GMPT タイプの singularity と（4）のとびを仮定すると、表面自由エネルギーは、一般に（6）式の形で書けることが分かる。この意味で、（6）式はファセット端が smooth であるときのそのファセット近くの面の表面自由エネルギーの一般形といえる。

＜文献＞

1) E.E.Gruber and W.W.Mullins:J.Phys.Chem.Solids **28** (1967) 6549.

2) V.L.Pokrovsky and A.L.Talapov:Phys.Rev.Lett. **42** (1979) 65.

3) T.Yamamoto, Y.Akutsu and N.Akutsu:J.Phys.Soc.Jpn. **57** (1988) 453.

4) Y.Akutsu,N.Akutsu and T.Yamamoto:submitted.

5) Y.Akutsu,N.Akutsu and T.Yamamoto:To be submitted.

6) T.Yamamoto and T.Izuyama:J.Phys.Soc.Jpn. **56** (1987) 632.

7) T.Izuyama and Y.Akutsu:J.Phys.Soc.Jpn. **51** (1982) 50.

8) T.Izuyama:J.Phys.Soc.Jpn. **51** (1982) 3449.

9) Y.Akutsu and N.Akutsu:J.Phys. **A19** (1986) 2813.

10) N.Akustu and Y.Akutsu:J.Phys.Soc.Jpn. **56** (1987) 2248.

11) N.Akutsu and Y.Akutsu:J.Phys.Soc.Jpn. **56** (1987) 1443.